

ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ VO_2 В ФАЗЕ РУТИЛА И МОНОКЛИННОЙ ФАЗЕ M_1 С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА LDA+DMFT

Белозеров А.С.

Руководитель – к.ф.-м.наук Потеряев А.И.

Уральский государственный технический университет-УПИ имени первого
Президента России Б.Н.Ельцина, г. Екатеринбург
alexander.s.belozerov@gmail.com

В диоксиде ванадия VO_2 при температуре 340 K происходит переход из высокотемпературной металлической тетрагональной R -фазы рутила в низкотемпературную диэлектрическую моноклинную фазу M_1 . К объяснению природы возникновения диэлектрического состояния в фазе M_1 можно подходить с двух позиций. Из анализа зонных расчетов, выполненных в рамках приближения локальной плотности (LDA), можно сделать вывод о том, что VO_2 в M_1 фазе является обычным зонным диэлектриком Пайерлса [1]. Тем не менее, LDA расчеты не воспроизводят наличие щели в зонной структуре M_1 фазы. С другой точки зрения, нельзя пренебрегать электронными корреляциями в d -оболочке ванадия, поэтому фаза M_1 должна рассматриваться как мотт-халбардовский диэлектрик. В данной работе мы представляем результаты расчета электронной структуры и магнитной восприимчивости VO_2 в фазе рутила и моноклинной фазе M_1 с помощью метода LDA+DMFT, в котором слабо коррелированные электроны рассматриваются в приближении LDA, а сильно коррелированные электроны описываются в рамках теории динамического среднего поля (DMFT) [2].

При изучении природы перехода в VO_2 большое значение имеют особенности кристаллической структуры. В высокотемпературной R -фазе атомы ванадия образуют объемноцентрированную тетрагональную решетку и окружены слабдеформированными кислородными октаэдрами. В отличие от тетрагональной R -фазы, содержащей цепочки равноудаленных атомов ванадия, в моноклинной фазе M_1 атомы ванадия образуют цепочки отклоненных димеров. Кристаллическое поле кислородного октаэдра расщепляет $3d$ -уровень ванадия на лежащие ниже по энергии трехкратно вырожденные t_{2g} -уровни и лежащие выше двукратно вырожденные e_g -уровни. Однако сильные тригональные искажения кислородных октаэдров приводят к понижению симметрии t_{2g} -уровней и расщепляет их на двукратно вырожденный e_g -уровень и невырожденный a_{1g} -уровень.

Для расчетов в приближении LDA использовался метод линеаризованных маффин-тин орбиталей в приближении сильной связи (LMTO) [3]. Согласно полученным результатам, в обеих фазах на уровне ферми присутствуют электронные состояния (рис. 1), что говорит о металлическом характере энергетического спектра. Таким образом, расчеты в приближении LDA не воспроизводят изоляторный характер фазы M_1 , что говорит о необходимости учета сильных электронными корреляциями в d -оболочке ванадия.

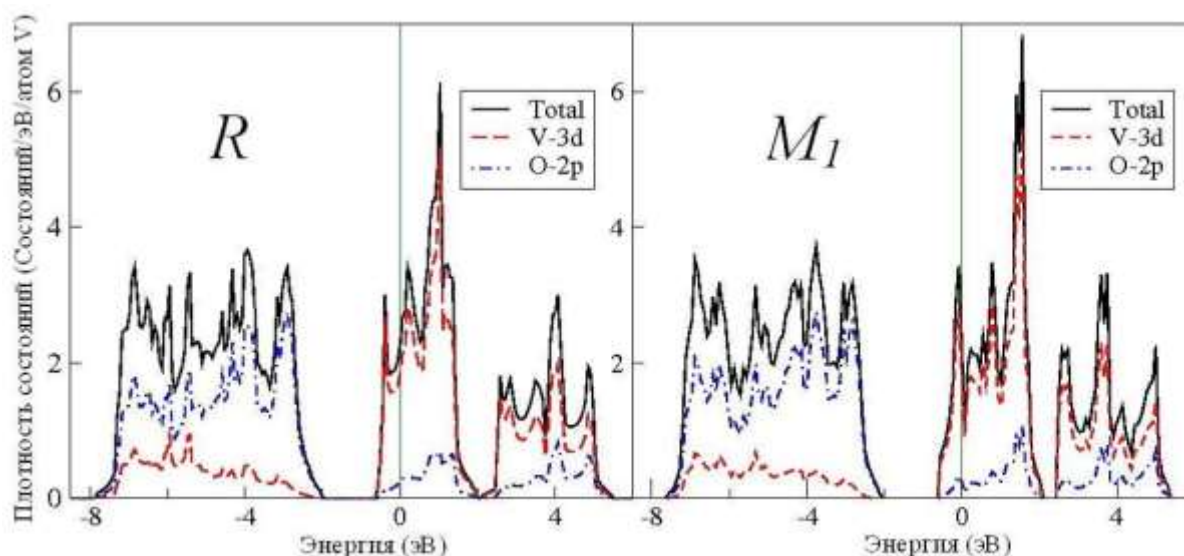


Рис. 1. Полная плотность состояний для фаз R (слева) и M_1 (справа), полученная в приближении LDA. Уровень ферми находится в нуле.

Для расчетов в рамках DMFT были получены гамильтонианы малой размерности, для этого использовался метод маффин-тин орбиталей N -ого порядка (NMTO). Примесная задача Андерсона решалась методом квантового Монте-Карло в алгоритме Хирша-Фая. Согласно полученным результатам, одноузельная модификация DMFT приводит к метал-лическому спектру фазы M_1 (рис. 2). Поэтому, для корректного описания димеров атомов ванадия, возникающих в фазе M_1 , была использована кластерная модификация теории динамического среднего поля (CDMFT), что позволило воспроизвести изоляторный характер спектра.

Применяя LDA+DMFT подход к изучению однородной магнитной восприимчивости, в рамках одноузельной модификации DMFT воспроизведен закон Кюри-Вейса для R -фазы (рис. 3). В связи с тем, что влияние кристаллического поля значительно превосходит температурные эффекты, а также использование метода квантового Монте-Карло ограничено областью высоких температур, изучение характера поведения магнитной восприимчивости в фазе M_1 производилось при температурах, превышающих температуру перехода. Согласно полученным результатам (рис. 3), применение одноузельной модификации DMFT для фазы M_1 дает качественно неверный результат, тогда как использование кластерной модификации приводит к верному характеру поведения магнитной восприимчивости.

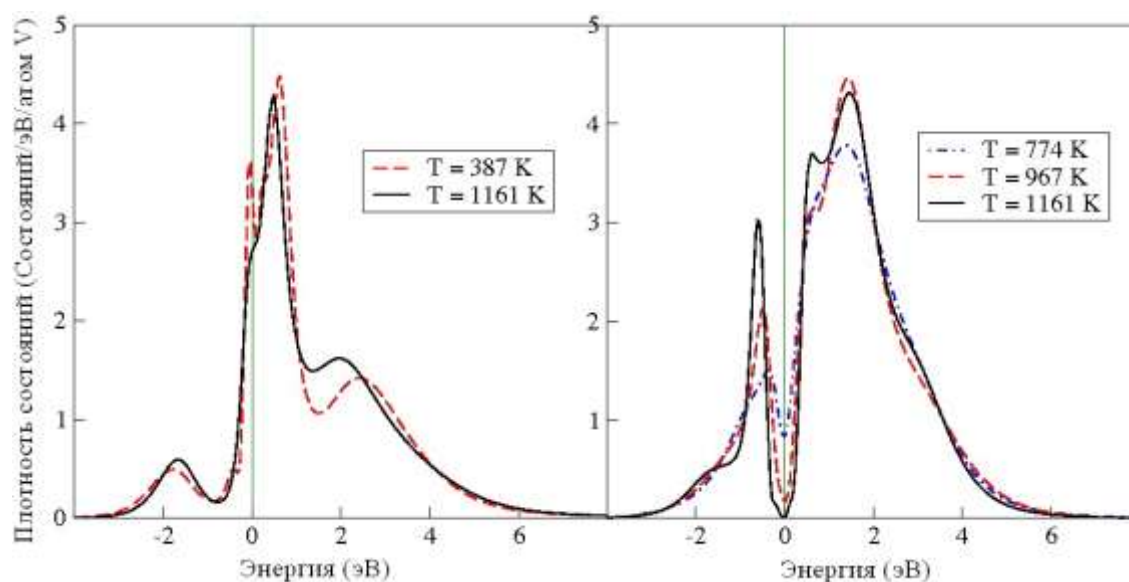


Рис. 2. Полная плотность состояний для фазы M_1 , полученная в рамках одноузельной модификации DMFT (слева) и кластерной модификации (справа). Уровень ферми находится в нуле.

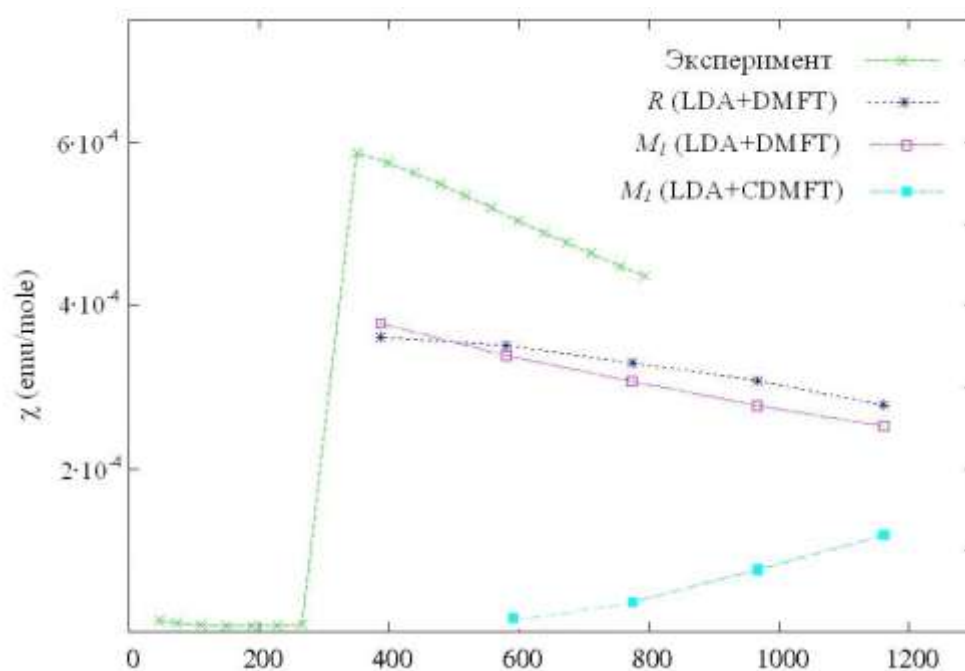


Рис. 3. Результаты расчетов однородной магнитной восприимчивости.

1. Goodenough J.B., Solid State Chem., V.3, №4, 490-500 (1971)
2. Georges A., Kotliar G., et al., Rev. Mod. Phys. 68, 13-125 (1996)
3. Andersen O.K. and O. Jepsen, Phys. Rev. Lett., V.53 №27 (1984)